

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Фролкиной Марии Алексеевны на тему: «Спиралеобразные олигомеры нанометрового размера как бистабильные динамические системы», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 — химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

Исследование свойств новых молекулярных бистабильных систем, обладающих потенциалом функционального применения в устройствах наноэлектроники, без сомнения, имеет очень большую актуальность. Диссертационная работа Фролкиной Марии Алексеевны посвящена установлению свойства динамической бистабильности спиральных пиридин-пиррольных (ПП) и пиридин-фурановых (ПФ) фолдамеров нанометрового размера и проявлению этого свойства в вибрационных эффектах, обусловленных индуцированными тепловым шумом переходами, стохастическим резонансом и спонтанной синхронизацией.

В работе рассматриваются два следующих типа систем: (1) единичные наноразмерные спиралеобразные ПФ- и ПП-олигомеры длиной либо в 5, либо в 7 пар гетероциклов; (2) мезоскопические маты, представляющие собой ПФ-олигомеры длиной в 5 пар гетероциклов, упорядоченные либо в плоские гексагоны, либо квадраты, накрытые листом графена, который ковалентно связан с ПФ-олигомерами через этиленгликолевые линкеры.

В проведенной работе получены следующие ключевые результаты:

1. Определены методами АМД-моделирования параметры критического растяжения, при котором у единичных ПФ- и ПП-фолдамеров возникает бистабильность. Построены диаграммы стационарных динамических состояний фолдамеров в воде и тетрагидрофуране при температурах, близких к комнатным. Показано, что ПФ- и ПП-фолдамеры характеризуются бистабильной динамикой в обоих растворителях при растяжениях порядка характерной длины межвиткового стекингового взаимодействия.

2. Определены частотные характеристики спонтанных вибраций фолдамеров, индуцированных тепловым шумом, а также найден их

резонансный отклик на действие слабого осциллирующего поля. Обнаружено, что бистабильность фолдамеров проявляется в виде спонтанных вибраций в мегагерцовом диапазоне при комнатной температуре и сопровождается эффектом стохастического резонанса при воздействии слабого осциллирующего электрического поля.

3. Предложена атомистическая модель фолдамерного мата, представляющая собой слой ПФ-фолдамеров гексагональной упаковки, накрытых связывающим их листом графена. Выполнены АМД-эксперименты по исследованию явления синхронизации спонтанных вибраций ПФ-фолдамеров, образующих мат, и охарактеризованы их амплитудно-частотные и резонансные характеристики. Установлено, что в таком мате могут возникать коллективные вибрационные моды, обусловленные явлением спонтанной синхронизации связанных бистабильных систем.

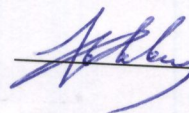
Автореферат диссертации хорошо иллюстрирован и изложен грамотным и логичным языком. К работе есть ряд небольших замечаний:

1. Предложенная модель упаковки фолдамеров внутри мата не может быть названа «плотной». Между фолдамерами не только отсутствует непосредственный контакт, но имеющиеся пустоты достаточны для размещения дополнительных аналогичных фолдамеров.

2. В работе продемонстрировано, что усиление упругого взаимодействия между фолдамерами внутри мата за счет увеличения жесткости конструкции приводит к достижению практически полной синхронизации пружин. При этом жесткость в модельном эксперименте была увеличена с помощью дополнительного кулоновского расталкивающего взаимодействия в местах крепления фолдамеров к графену, вызванного внесением одноименных зарядов. Такой подход может быть оправдан для проверки эффекта в рамках модели, но возможность его реализации в реальном эксперименте представляется крайне трудной. Гораздо проще и ближе к реальному эксперименту было бы повысить жесткость системы либо с помощью замены легко деформируемого этиленгликолевого линкера на более короткую структуру, либо за счет уменьшения расстояния между фолдамерами, упаковка которых, как отмечалось в замечании выше, довольно далека от «плотной».

Приведенные замечания нисколько не снижают высокую оценку работы. Считаю, что автореферат полностью отвечает требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям. Автор диссертации Фролкина Мария Алексеевна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 — химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Старший научный сотрудник лаборатории
терагерцовой спектроскопии
Федерального государственного автономного
образовательного учреждения высшего
образования «Московский физико-технический
институт (национальный исследовательский
университет)» (МФТИ, Физтех),
к.х.н.


К.А. Мотовилов
18.03.2026

Подпись с.н.с. Мотовилова К.А. удостоверяю:

Адм. канцел.
Александрова
Сидорова



Адрес: 141700, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский
переулок, дом 9
Тел.: +7(498)744-64-98
E-mail: motovilov.ka@mipt.ru